

BAB I PENDAHULUAN

1.1 Latar Belakang

Korosi adalah istilah yang digunakan untuk kerusakan suatu logam akibat proses elektrokimia yang dapat menurunkan kualitas logam tersebut. Kerusakan akibat korosi yang sering kita lihat dalam kehidupan sehari-hari seperti karat pada besi, noda pada perak serta kerusakan pada kendaraan [2]. Proses elektrokimia yang terjadi adalah reaksi redoks dimana logam mengalami oksidasi dan oksigen mengalami reduksi. Dalam sel elektrokimia, korosi dapat berlangsung apabila semua komponen tersedia yaitu anoda, katoda, jembatan garam serta elektrolit [3].

Peristiwa korosi pada logam merupakan fenomena yang tidak dapat dihindari, namun dapat dihambat maupun dikendalikan untuk mengurangi kerugian dan mencegah dampak negatif yang diakibatkannya. Oleh karena itu, banyak metode yang telah dirancang untuk melindungi logam dari pembentukan karat. Pada permukaan bagian luar logam dapat dilindungi dengan cara pelapisan cat, namun pada permukaan bagian dalam logam dapat ditambahkan inhibitor korosi untuk memperlambat laju korosi. Inhibitor korosi itu sendiri merupakan suatu zat kimia yang ditambahkan pada lingkungan korosif walaupun dalam jumlah yang kecil akan berpengaruh dalam menurunkan laju korosi, sehingga relatif mudah dan murah [4].

Berdasarkan senyawa kimianya, inhibitor terdiri dari dua jenis yaitu inhibitor senyawa organik dan inhibitor senyawa anorganik. Inhibitor senyawa anorganik memiliki efisiensi inhibisi yang baik namun dapat menimbulkan masalah bagi lingkungan. Maka inhibitor yang umum dipakai yaitu senyawa yang teradsorpsi dengan baik pada permukaan logam, serta ramah lingkungan adalah inhibitor organik yaitu senyawa heterosiklik yang bersifat hidrofob, seperti nitrogen, oksigen, sulfur, fosfor, ikatan rangkap atau cincin aromatik. Salah satunya adalah senyawa turunan imidazol karena mempunyai elektron bebas pada atom nitrogen sehingga dapat mengadsorpsi pada permukaan logam [5].

Penelitian secara eksperimen terkait senyawa turunan imidazol yang digunakan sebagai inhibitor korosi telah dilakukan [1]. Hasil penelitian Annisa Fauzianur Phratamy (2012) menunjukkan adanya potensi inhibisi yang baik

sebagai inhibitor pada senyawa organik 2-fenil-1-H-fenantro[9,10-D]imidazol dan 2-(2-hidroksifenil)-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dengan metode tafel.

Kajian teoritis kimia kuantum telah dilakukan, Sapri Hamdiani (2014) melaporkan bahwa pemodelan molekul terhadap senyawa turunan fenil-pirazolindol sebagai anti korosi berdasarkan metode *ab initio* pada tingkatan teori HF/DZV. Hasil perhitungan teoritis menunjukkan bahwa efisiensi anti korosi (IE%) memiliki korelasi yang baik dengan parameter sifat elektronik [6].

Senyawa yang digunakan sebagai inhibitor korosi adalah inhibitor organik 2-fenil-1-H-fenantro[9,10-D]imidazol yang merupakan hasil penelitian dari Annisa Phratamy (2012) karena belum pernah dikaji secara komputasi. Senyawa ini merupakan hasil sintesis dari Indri Gustiani (2012) yang mempunyai sifat fisik berwarna hijau dengan titik leleh 313,5-314°C [7]. Senyawa ini dikatakan inhibitor karena mempunyai struktur molekul planar, kerapatan elektron tinggi dan mengandung atom nitrogen dengan pasangan elektron bebas sehingga memungkinkan teradsorpsi kuat pada permukaan logam dan meningkatkan aktivitas inhibisi korosi [1].

Penelitian studi komputasi ini akan dilakukan untuk mempelajari optimasi geometri dan sifat elektronik senyawa inhibitor korosi dengan variasi metoda yaitu *Density Functional Theory* (DFT) dan *Restricted Hartree Fock* (RHF). Pada masing-masing metode dilakukan variasi himpunan basis yaitu 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p), dan 6-311++G(d,p) dalam fasa gas. Kemudian dibandingkan dengan fasa air menggunakan metoda RHF/6-31+G(d,p) serta senyawa induk imidazol menggunakan metoda dan himpunan basis B3LYP/6-31+G(d,p) dalam fasa gas.

1.2 Rumusan Masalah

Berdasarkan latar belakang di atas maka permasalahan yang perlu dirumuskan adalah sebagai berikut:

1. Bagaimana hasil optimasi struktur pada senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol?, dan
2. Bagaimana sifat elektronik pada senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol?

1.3 Batasan Masalah

Berdasarkan permasalahan yang telah dirumuskan, penelitian ini akan dibatasi pada beberapa masalah berikut:

1. Model senyawa inhibitor korosi yang digunakan yaitu senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol,
2. Perhitungan komputasi ini menggunakan metode RHF dan DFT dengan himpunan basis 6-31G(d), 6-31G(d,p), 6-31+G(d,p) dan 6-311++G(d,p),
3. Penentuan optimasi geometri senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol yang dihitung panjang ikatan, sudut ikatan, muatan mulliken atom serta kerapatan elektron di orbital HOMO-LUMO, dan
4. Penentuan sifat elektronik senyawa imidazol dan senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol yang meliputi celah energi, momen dipol, keelektronegatifan, *global hardness*, *global softness*, dan fraksi transfer elektron.

1.4 Tujuan Penelitian

Berdasarkan latar belakang dan rumusan masalah yang diajukan, tujuan dilakukannya penelitian ini adalah sebagai berikut:

1. Menentukan hasil optimasi struktur pada senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol, dan
2. Menentukan sifat elektronik pada senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol.

1.5 Manfaat Penelitian

Hasil penelitian ini diharapkan dapat bermanfaat dan memberikan informasi untuk pendidikan, masalah lingkungan, dan bidang lainnya yang memiliki kaitan dengan inhibitor korosi terutama pada senyawa 2-fenil-1H-fenantro[9,10-D]imidazol dengan mengurangi dan mencegah dampak negatif yang diakibatkan oleh korosi.